

10; 12

© 1991

ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ СТМ-ИЗОБРАЖЕНИЯ НАНОМЕТРОВОГО ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КЛАСТЕРА НА ПОВЕРХНОСТИ ПРОВОДНИКА

М.Ю. Сумецкий, М.Л. Фельштын

Создание Биннигом и Рорером сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) [1] предоставило в руки экспериментаторов уникальный инструмент для исследования рельефа поверхности проводящего материала. Вместе с тем, возникла проблема интерпретации получаемого СТМ-изображения, в частности, проблема связи СТМ-изображения с реальным рельефом исследуемой поверхности.

Настоящая работа посвящена построению СТМ-изображения туннельно прозрачного диэлектрического кластера нанометровых размеров, находящегося на поверхности проводника. Рассматриваемая структура изображена на рис. 1. Поверхность кластера описывается функцией $f_2(\vec{x})$. Предполагается, что характерное расстояние, на котором изменяется $f_2(\vec{x})$, много больше, чем межатомное расстояние, длина волны электрона и радиус острия СТМ. Поверхность проводника (подложка), на которой находится кластер, считается плоской.

В [2] при аналогичных предположениях была решена задача о восстановлении формы нанометрового проводника под плоской поверхностью туннельно прозрачной пленки. Задача, рассматриваемая в настоящей работе, не менее важна для приложений. Оказывается, что ее также удается решить аналитически.

Будем описывать вакуумный промежуток и кластер простейшей моделью, как потенциальный барьер с постоянным абсолютным значением волнового вектора, соответственно μ_1 и μ_2 . В экспоненциальном приближении туннельный ток $j \sim \exp(-2S)$, где

$$S(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_0) = \mu_1 \left((f_1 - f_2)^2 + (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^2 \right) + \mu_2 \left(f_2^2 + (\vec{x}_2 - \vec{x}_0)^2 \right)^{1/2} \quad (1)$$

есть абсолютное значение действия взятого вдоль наиболее вероятного пути туннелирования (НВПТ) [3], Здесь $(\vec{x}_1, f_1(\vec{x}_1))$, $(\vec{x}_2, f_2(\vec{x}_2))$ и $(\vec{x}_0, 0)$, соответственно координаты точек пересечения НВПТ с поверхностью острия, диэлектрика и подложки (рис. 1) (через \vec{x} мы обозначаем вектор (x, y)).

Так как радиус острия по предположению мал по сравнению с характерным значением радиуса кривизны исследуемой поверхности, то функция $f_1(\vec{x})$ определяет траекторию острия, совпадающую с СТМ-изображением.

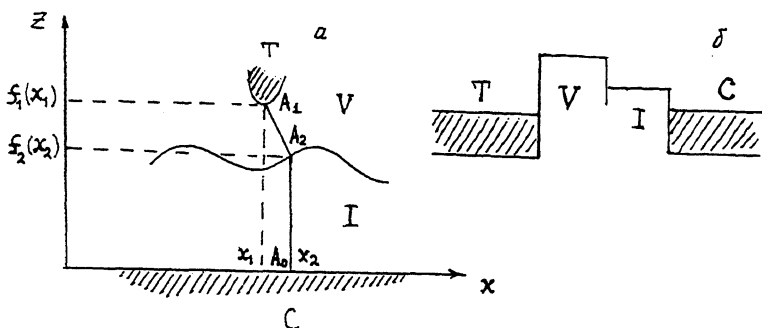


Рис. 1. (а) Схематическое изображение структуры: острое СТМ - Т, диэлектрический кластер - I, проводник - С, вакуумный промежуток - V. Ломанная линия $A_1A_2A_0$ - НВПТ. Ось y перпендикулярна рисунку. (б) Энергетическая диаграмма структуры вдоль НВПТ.

При заданных координатах острия $(\bar{x}_1, f_1(\bar{x}_1))$ и заданном рельефе кластера $f_2(\bar{x}_2)$, НВПТ представляет собой ломанную линию, которая определяется из условия минимизации действия \mathcal{S} как функции \bar{x}_2 и \bar{x}_0 . Это условия приводит к системе из двух уравнений:

$$\bar{x}_0 = \bar{x}_2, \quad \gamma(f_{2x} - (f_1 - f_2) + (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)) = \gamma_2((f_1 - f_2)^2 + (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)^2)^{1/2} f_{2\bar{x}}. \quad (2)$$

Действие \mathcal{S} в рассматриваемом экспоненциальном приближении постоянно, так как ток поддерживается постоянным. Используя (1), (2) и условие постоянства \mathcal{S} , СТМ-изображение $(\bar{x}_1, f_1(\bar{x}_1))$ удастся выразить через форму поверхности $f_2(\bar{x}_2)$ в параметрической форме:

$$f_1 = f_2 + A(|f_{2\bar{x}}|^2 \gamma + B), \quad \bar{x}_1 = \bar{x}_2 + A(\gamma - B)f_{2\bar{x}}, \quad (3)$$

$$A = \frac{L - \gamma f_2}{(1 + |f_{2\bar{x}}|^2)}, \quad B = (1 + |f_{2\bar{x}}|^2(1 - \gamma^2))^{1/2},$$

где введена характерная длина $L = (S / \gamma_1)$ и безразмерный параметр $\gamma = (\gamma_2 / \gamma_1)$. Формула (3) позволяет строить изображение по заданной форме поверхности кластера непосредственно, не решая каких-либо уравнений. Не менее интересным результатом представляется то, что (3) удастся обратить, выразив искомую поверхность $f_2(\bar{x})$ через ее изображение $f_1(\bar{x})$:

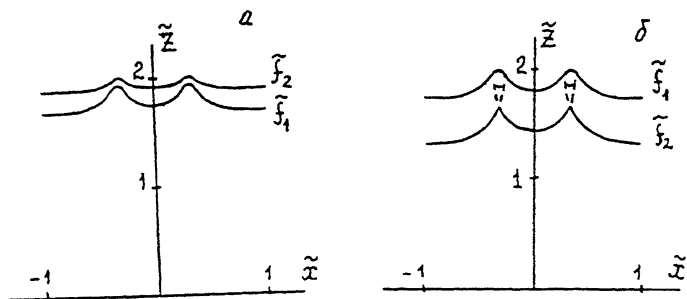


Рис. 2. Примеры восстановления при $\gamma=0.5$: (а) – СТМ-изображения f_1 по форме кластера f_2 , (б) – формы кластера f_2 по СТМ-изображению f_1 . Введены безразмерные функции $\tilde{f}_j = f/L$ и координаты $\tilde{x}_j = x/L$, $\tilde{z} = z/L$.

$$f_2(\tilde{x}_2) = (f_1(1 + |f_{1\tilde{x}}|^2)^{1/2} - L)C, \quad \tilde{x}_2 = \tilde{x}_1 + C(L - \gamma f_1) f_{1\tilde{x}}, \quad (4)$$

$$\text{где } C = ((1 + |f_{1\tilde{x}}|^2)^{1/2} - \gamma)^{-1}.$$

Формулы (3) и (4) таким образом решают как прямую, так и обратную задачу о связи формы поверхности и ее изображения.

Рассмотрим частные случаи. Условие $\gamma=0$ соответствует случаю, когда диэлектрический кластер отсутствует, а проводящая подложка описывается функцией $f_2(\tilde{x}_2)$, при этом для изображения $f_1(\tilde{x}_1)$ имеем:

$$f_1(\tilde{x}_1) = f_2 + \frac{L}{(1 + |f_{2\tilde{x}}|^2)^{1/2}}, \quad (5)$$

$$x_1 = x_2 - \frac{L f_{2\tilde{x}}}{(1 + |f_{2\tilde{x}}|^2)^{1/2}}.$$

Рассмотрим случай, когда функция $f_2(\tilde{x})$, описывающая рельеф кластера, имеет малый наклон, т.е. $|f_{2\tilde{x}}| \ll 1$, при этом имеем:

$$f_1 = L + (1 - \gamma) f_2, \quad x_1 = x_2 - (L - \gamma f_2)(1 - \gamma) f_{2\tilde{x}}. \quad (6)$$

На рис. 2 приведен пример восстановления траектории острья, получаемой при сканировании поверхности кластера заданной

формы $f_2(\vec{x})$, а также пример восстановления формы кластера по СТМ-изображению $f_1(x_1)$. Следует отметить, что восстановление указанных траекторий по формулам (3), (4) не всегда однозначно, однако, показанное пунктиром на рис. 2 дополнительное решение (зарождающиеся в области расщепления НВПТ) надо отбросить из простых физических соображений.

Полученные результаты можно обобщить на случай, когда подложка не является плоской. В этом случае для решения прямой и обратной задачи необходимо решить дополнительное трансцендентное уравнение.

Авторы признательны А.О. Голубку и Н.А. Тарасову за полезное обсуждение работы.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] B i n n i g C., R o h r e r H., G e r b e r Ch., W e i b e l E. // Appl. Phys. Lett. 1982. V. 40. P. 178.
- [2] S u m e t s k i i M. // J. Phys.: Condens. Matter. 1990. V. 2. P. 2487-2490.
- [3] С у м е ц к и й М.Ю. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. В. 3. С. 7-22.

Поступило в Редакцию
19 марта 1991 г.